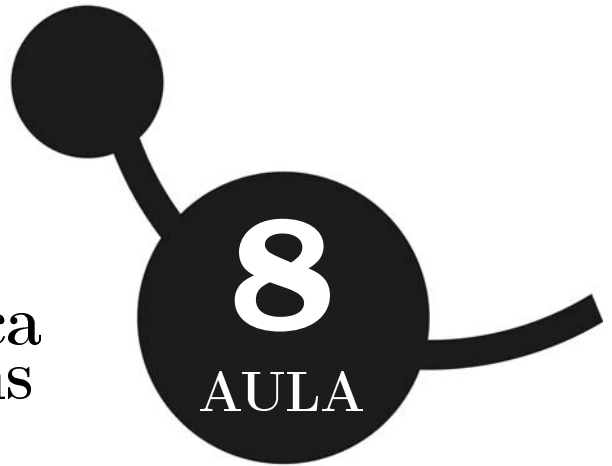
Mecânica estatística quântica I: férmions

META

Construir o formalismo da mecânica estatística quântica para férmions.

OBJETIVOS

Ao fim da aula os alunos deverão ser capazes de:

Entender a influência das propriedades quânticas na construção do formalismo da mecânica estatística.

Obter a distribuição de Fermi-Dirac.

Abordar o gás ideal de férmions.

Resolver problemas envolvendo estes conceitos.

PRÉ-REQUISITOS

Aulas anteriores e cálculo diferencial e integral.

8.1 Introdução

Prezado aluno, na aula 5 construímos o formalismo da mecânica estatística para sistemas clássicos. Com isso, nas aulas 6 e 7 aplicamos este formalismo no estudo de gases. No entanto, é possível reformular a mecânica estatística considerando as propriedades quânticas microscópicas dos componentes dos sistemas macroscópicos. Por exemplo, levar em conta as propriedades de simetria da função de onda [1].

Nesta aula, iremos construir de maneira simplificada o formalismo de mecânica estatística quântica para estudarmos sistemas fermiônicos*.

*Férmions são partículas quânticas que possuem número quântico de spin semi-inteiro $(s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \ldots)$ como, por exemplo, o elétron $(s = \frac{1}{2})$. Estas partículas possuem função de onda antissimétrica e, por isso, devem satisfazer o princípio de exclusão de Pauli [1].

8.2 Distribuição de Fermi-Dirac

Na sec. 5.4 , deduzimos a distribuição de Maxwell-Boltzmann, achando o número de microestados e maximizando-o. No entanto, na mecânica clássica é possível distinguir duas partículas mesmo que estas sejam idênticas, pois é possível seguir a trajetória de cada uma das partículas e, com isso, saber diferenciar as partículas em função do tempo.

Em mecânica quântica, o princípio da incerteza Heisenberg estabelece que é impossível determinar simultaneamente posição e momento de um partícula, provocando o desconhecimento da trajetória de maneira determinística. Isto implica que as partículas quânticas devem ser indistinguíveis. Uma das consequências da indistinguibilidade é que a função de onda de duas partículas idênticas deve ser simétrica ou anti-simétrica com relação à permutação das partículas. Partículas com função de onda simétrica são

bósons e as com função de onda antissimétrica são férmions. A antisimetria da função de onda dos férmions dá suporte ao princípio de exclusão de Pauli (PEP), o qual estabelece que dois ou mais férmions não podem ter o mesmo estado quântico [1].

8.2.1 Contando microestados

Vamos considerar um sistema composto de N férmions idênticos e não interagentes, os quais estão distribuídos num espectro de energia discreto com L valores possíveis $\epsilon \in \{\epsilon_j\}_{j=1}^{L}$. Cada valor de energia ϵ_j possui n_j férmions e g_j níveis, ou seja, existem g_j estados quânticos com energia ϵ_j. Em outras palavras, g_j é a degenerescência da energia ϵ_j [1].

Visando considerar as propriedades quânticas dos férmions, em especial o PEP, temos que readaptar a contagem de microestados feita na sec. 5.4.1 . Para isso, temos que considerar que apenas um férmion pode ocupar cada um dos níveis g_j. Sendo assim, ao invés de usarmos o fator multiplicativo $g_j^{n_j}/n_j!$, como feito no caso clássico, devemos reanalisar este fator levando em conta o PEP. Portanto, temos que recalculá-lo considerando uma combinação de n_j férmions em g_j níveis, sendo estes partículas indistinguíveis, por consequência de propriedades quânticas. Sendo assim, este fator é alterado da seguinte forma

$$\frac{g_j^{n_j}}{n_j!} \rightarrow \frac{g_j!}{n_j!(g_j - n_j)!}$$

Com a eq. (5.11) sendo readaptada para férmions seguindo a alteração acima, temos que o número de microestados é

$$\mathcal{W}(n_1, \ldots, n_L) = \prod_{j=1}^{L} \frac{g_j!}{n_j!(g_j - n_j)!}. \tag{8.1}$$

8.2.2 Maximizando o número de microestados

Seguindo a prescrição da sec. 5.4.2 , fazemos a maximização de $\mathcal{W}$ e obtemos

$$n_j = \frac{g_j}{\exp(\alpha + \beta\epsilon_j) + 1}, \tag{8.2}$$

onde continuamos com

$$\beta = \frac{1}{k_B T}. \tag{8.3}$$

A probabilidade de um férmion ter energia ϵ_j, é obtida fazendo $P_j = n_j/N$ [eq. (5.7)] e, sendo assim, temos

$$P_j = \frac{1}{N}\frac{g_j}{\exp(\alpha + \epsilon_j/k_B T) + 1}.$$

A constante α é encontrada com a condição de normalização da probabilidade, $\sum_{j=1}^{L} P_j = 1$.

8.2.3 Energia de Fermi

Por conveniência, podemos identificar a grandeza μ, chamada de potencial químico da seguinte forma

$$\mu = -\alpha k_B T.$$

Esta grandeza tem unidade de energia e está relacionada com variações energéticas ocasionadas pela variação do número de partículas do sistema e, em geral, depende da temperatura [2]. Em temperatura nula, o potencial químico corresponde à energia de Fermi

$$\epsilon_F = \mu(T = 0).$$

Agora, podemos escrever

$$P_j = \frac{g_j}{N} f(\epsilon_j), \tag{8.4}$$

sendo esta a distribuição de Fermi-Dirac, adequada para férmions e

$$f(\epsilon) \equiv \frac{1}{\exp\left[(\epsilon-\mu)/k_B T\right]+1} \tag{8.5}$$

é a função de Fermi. É interessante observar que, quando $T = 0$, temos

$$f(\epsilon) = \begin{cases} 1, & \epsilon < \epsilon_F; \\ 1/2, & \epsilon = \epsilon_F; \\ 0, & \epsilon > \epsilon_F. \end{cases} \tag{8.6}$$

Por outro lado, quando $T \to \infty$, temos

$$f(\epsilon) = \frac{1}{2}. \tag{8.7}$$

Também é conveniente identificarmos a seguinte temperatura característica

$$\Theta_F \equiv \frac{\epsilon_F}{k_B}, \tag{8.8}$$

chamada de temperatura de Fermi.

Através da eq. (8.4), percebemos que, para j constante, $P_j \propto f(\epsilon_j)$. A fig. 8.1 mostra o comportamento da função de Fermi para alguns valores de temperatura. Note que quando a temperatura é nula, qualquer valor de energia abaixo de ϵ_F é equiprovável e, acima de ϵ_F, é impossível, pois a probabilidade é nula. Este resultado está de acordo com a eq. (8.6). Com isso, podemos fazer a seguinte interpretação:

em temperatura nula, a maior energia possível que um férmion pode ter é a energia de Fermi.

É possível observar que com um pequeno aumento de temperatura, como é o caso de $T = 0{,}1\Theta_F$, f reduz para $\epsilon_j \lesssim \epsilon_F$ e aumenta para $\epsilon_j \gtrsim \epsilon_F$. Além disso, f tende a se tornar uniforme à medida que a temperatura aumenta, concordando com a eq. (8.7).

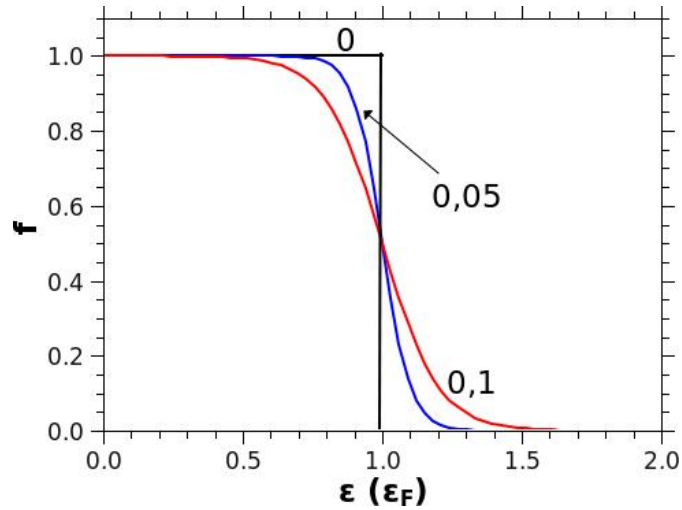



Figura 8.1: Função de fermi para quatro temperaturas distintas. Os números rotulando cada curva correspondem aos valores de temperatura em unidades de Θ_F.

8.3 Gás ideal de elétrons

Um exemplo simples para aplicarmos o formalismo de Fermi-Dirac é o gás de elétrons livres. Considerando os elétrons confinados em uma caixa cúbica muito grande de arestas a, temos que a energia de cada elétron é

$$\epsilon = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}k^2, \tag{8.9}$$

onde $k^2 = j_1^2+j_2^2+j_3^2$, com $j_1, j_2, j_3 \in \mathbb{N}$ [1]. Sendo assim, o número de pontos com coordenadas inteiras e não negativas no interior de uma esfera de raio k, são o número de estados com energia abaixo de ϵ. Como o espaçamento de níveis de energia é da ordem de $\hbar^2/ma^2$ [eq. (8.9)] e a a é muito grande, podemos tomar o limite do contínuo e obter a densidade de níveis, a qual está relacionada

com a casca desta esfera de raio k. Portanto, temos

$$g(\epsilon) = 2\frac{1}{8}\int d^3\vec{k}\delta\left(\epsilon - \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}k^2\right). \qquad (8.10)$$

O fator 2 multiplicando a integral é consequência da degenerescência de spin, pois cada estado (j_1, j_2, j_3), possui a mesma energia para elétrons com orientações opostas de spin ($\downarrow$ ou $\uparrow$). O fator 1/8 é por conta das coordenadas j_1, j_2 e j_3 serem não negativas e, por isso, a integração deve ser em apenas um octante da esfera. Com um cálculo análogo ao realizado na sec. 5.5 , obtemos

$$g(\epsilon) = \frac{8\pi V(2m^3)^{1/2}}{h^3}\epsilon^{1/2}. \qquad (8.11)$$

Sendo assim, podemos encontrar a densidade de probabilidade de FD,

$$\rho(\epsilon) = \frac{g(\epsilon)}{N}f(\epsilon),$$

para o gás ideal de elétrons

$$\rho(\epsilon) = \frac{8\pi V(2m^3)^{1/2}}{Nh^3}\epsilon^{1/2}f(\epsilon), \qquad (8.12)$$

A fig. 8.2 exibe a distribuição de energia $\rho(\epsilon)$ para o gás de elétrons. Note que, como o aumento de temperatura, $\rho(\epsilon)$ tende a aumentar para $\epsilon > \epsilon_F$ e, consequentemente, reduzir para $\epsilon < \epsilon_F$, visto que a área sobre a curva deve sempre ser igual à unidade, pois trata-se de uma densidade de probabilidade. Podemos interpretar estas características da seguinte forma: os elétrons mais energéticos, com energia pouco abaixo de ϵ_F quando $T = 0$, migram para níveis com energia pouco acima de ϵ_F por consequência do aquecimento, $\Delta T = 0{,}1\Theta_F$. Além disso, esta tendência de elétrons migrarem para níveis mais excitados aumenta com a temperatura.

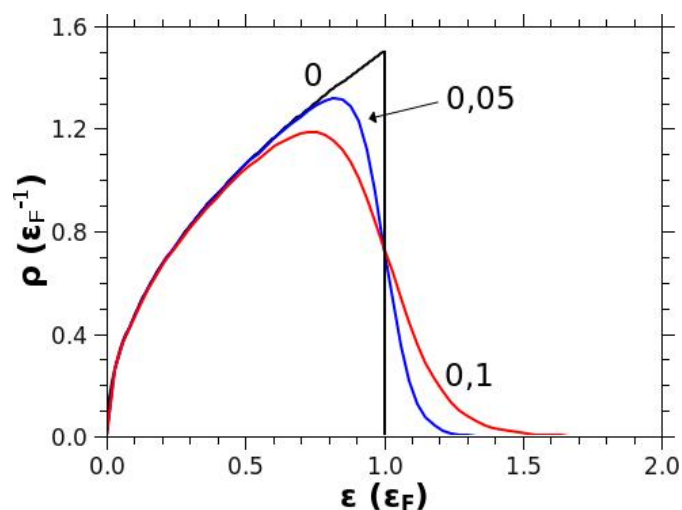



Figura 8.2: Densidade de probabilidade em função da energia (distribuição de energia) para um gás de elétrons livres. Os números rotulando cada curva correspondem aos valores de temperatura em unidades de Θ_F.

Exemplo 8.3.1. Encontre a energia de Fermi para o gás ideal de elétrons.

Solução: A energia de Fermi deve ser calculada em $T = 0$. Através das eqs. (8.6) e (8.12), podemos verificar que em temperatura nula, temos

$$\rho(\epsilon) = \begin{cases} \frac{8\pi V(2m^3)^{1/2}}{Nh^3}\epsilon^{1/2}, & \epsilon < \epsilon_F; \\ 0, & \epsilon > \epsilon_F. \end{cases} \quad (8.13)$$

Considerando a condição de normalização da densidade de

probabilidade, temos

$$
\begin{aligned}
\int_0^\infty \rho(\epsilon)d\epsilon &= 1, \\
\int_0^{\epsilon_F} \rho(\epsilon)d\epsilon + \int_{\epsilon_F}^\infty \underbrace{\rho(\epsilon)}_{0} d\epsilon &= 1, \\
\frac{8\pi V(2m^3)^{1/2}}{Nh^3}\int_0^{\epsilon_F} \epsilon^{1/2}d\epsilon &= 1, \\
\frac{8\pi V(2m^3)^{1/2}}{Nh^3}\frac{2}{3}\epsilon_F^{3/2} &= 1.
\end{aligned}
$$

Consequentemente,

$$
\begin{aligned}
\epsilon_F^{3/2} &= \frac{3h^3N}{(2m)^{3/2}8\pi V} \\
&= \frac{h^3}{8(2m)^{3/2}}\frac{3N}{\pi V}.
\end{aligned}
$$

Finalmente, encontramos a energia de Fermi

$$
\epsilon_F = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{3N}{\pi V}\right)^{2/3}. \tag{8.14}
$$

8.4 Conclusão

Considerando o princípio de exclusão de Pauli, conseguimos reformular a mecânica estatística para férmions. Com isso, surge a distribuição de Fermi-Dirac, que é diferente da de Maxwell-Boltzmann (válida para sistemas clássicos).

8.5 Resumo

A distribuição de Fermi-Dirac para férmions não interagentes é dada por

$$
P_j = \frac{g_j}{N}f(\epsilon_j),
$$

onde

$$f(\epsilon) \equiv \frac{1}{\exp\left[(\epsilon - \mu)/k_B T\right] + 1}.$$

é a função de Fermi. Para um gás ideal de elétrons temos

$$\rho(\epsilon) = \frac{8\pi V (2m^3)^{1/2}}{N h^3} \epsilon^{1/2} f(\epsilon),$$

com energia de Fermi

$$\epsilon_F = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{3N}{\pi V} \right)^{2/3}.$$

8.6 Atividades

ATIV. 8.1. Mostre que ao maximizar o número de microestados da eq. (8.1) se obtém a eq. (8.2).

Comentário: Esta maximização pode ser feita com o uso de multiplicadores de Lagrange. Uma consulta na ref. [1] poderá auxiliar na resolução desta atividade.

ATIV. 8.2. Demonstre as eqs. (8.6) e (8.7), as quais correspondem aos limites de, respectivamente, temperatura nula e temperatura infinita da função de Fermi.

Comentário: Considere o intervalo de energia antes de tomar o limite na temperatura.

ATIV. 8.3. Calcule a integral da eq. (8.10) até obter a densidade de níveis da eq. (8.11) para o gás ideal de elétrons.

Comentário: Esta integral pode ser resolvida como feito na sec. 5.5. Lembre-se que o volume de um cubo é a sua aresta ao cubo.

ATIV. 8.4. Para um gás ideal de elétrons mostre que (a) a distribuição de velocidade para um gás ideal de elétrons é

$$\xi(v) = \frac{8\pi V m^3}{N h^3} v^2 f\left(\frac{mv^2}{2}\right).$$

Em temperatura nula, mostre que (b) a energia interna por partícula é

$$u \equiv \langle \epsilon \rangle = \frac{3}{5}\epsilon_F, \qquad (8.15)$$

e que (c) que a velocidade média dos elétrons é

$$\langle v \rangle = \frac{3}{4} v_F,$$

onde v_F é a velocidade de Fermi, a qual é referente à energia de Fermi, ou seja,

$$\epsilon_F = \frac{m v_F^2}{2}.$$

(d) Note que a energia média por partícula $\langle \epsilon \rangle$ e a velocidade média $\langle v \rangle$ não satisfazem a relação

$$\langle \epsilon \rangle = \frac{m\langle v \rangle^2}{2}.$$

Isto é esperado? Justifique sua resposta. (e) Verifique se a seguinte relação é verdadeira

$$\langle \epsilon \rangle = \frac{m\langle v^2 \rangle}{2}.$$

Comente o resultado, comparando com o do item anterior. (f) Calcule a energia interna total e a velocidade média dos elétrons de um gás de elétrons não interagentes a 0 K com 10^{22} elétrons por cm^3.

Comentário: O procedimento para encontrar a distribuição de velocidades a partir da distribuição de energia está presente no final da sec. 5.5 . Conhecendo uma densidade de probabilidade, é possível calcular seus momentos, como visto na sec. 4.4. Uma consulta na ref. [1] poderá auxiliar na resolução desta atividade.

ATIV. 8.5. Usando o modelo de férmions livres, mostre que a energia total de um núcleo formado por N nêutrons e Z prótons é

$$U \approx \frac{N^{5/3} + Z^{5/3}}{A^{2/3}}\ 23{,}4 \text{ Mev},$$

onde $A = N + Z$ é o número de massa do núcleo. (Atividade adaptada da ref. [1].)

Comentário: Lembre-se que o volume de um núcleo é $\frac{4}{3}\pi r_0^3 A$, onde $r_0 \equiv 1{,}4 \times 10^{-15}$ m. Além disso, prótons e nêutrons são partículas de spin $s = 1/2$. Uma consulta na ref. [1] poderá auxiliar na resolução desta atividade.

8.7 Próxima aula

Na próxima aula, faremos um estudo análogo ao desta, abordando a estatística dos bósons. Encontraremos uma distribuição diferente das de Maxwell-Boltzmann e de Fermi-Dirac.

Referências

[1] ALONSO, M; FINN, E. J. *Fisica. Volumen III*: Fundamentos Cuanticos y Estadisticos. Edicion Revisada y Aumentada. Wilmigton:

Addison-Wesley Iberoamericana, 1986.

[2] REICHL, L. E. *A Modern Course in Statistical Physics*. 2.ed. Weinhein: WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2004.